



TITLE:

希土類及びアクチニド化合物の電子構造とフェルミ面(第42回 物性若手夏の学校(1997年度))

AUTHOR(S):

眞榮平, 孝裕

CITATION:

眞榮平, 孝裕. 希土類及びアクチニド化合物の電子構造とフェルミ面(第42回 物性若手夏の学校(1997年度)). 物性研究 1997, 69(3): 578-578

ISSUE DATE:

1997-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96178>

RIGHT:

非自己相似集合と計算

齊藤 朝輝 東大院総合 金子研
saito@complex.c.u-tokyo.ac.jp

万能チューリング機械の停止集合を空間上に埋め込んだ幾何集合は、自己相似構造でなく、異なった構造が無限に続くフラクタルとなる。マンデルブロー集合も多様な構造をもつフラクタルとして知られている。この2つの集合は、それ以外に、

1. 集合の判定手続きに要する計算時間の分布が、ベキ的、またはそれより緩やかに減衰する
2. 漸近的振る舞いも含め、境界次元が空間次元に等しくなる

という2点に関しても、自己相似フラクタルとは非常に異なった、共通の性質を持つことを示す。

万能チューリング機械の停止する入力集合は万能言語 (universal language) と呼ばれ、帰納的可算集合だが、帰納的集合ではない。つまり決定不能である。この万能言語の決定不能性から、万能言語を空間上に埋め込んだ (コードした) 図形は一般的に知られているフラクタル図形のような相似構造ではなく、異なった微細構造が無限に続く図形となる。マンデルブロー集合に関して、マンデルブロー集合の持つ自己相似性に関心が持たれて来た一方で、非常に複雑な構造を持つ集合であることが広く知られている。

これら2つの集合は、集合の判定手続きの停止集合 (または、その補集合) になっているという意味では、区別することはできない。数値的に解析した結果、万能言語に含まれるかどうかを判定する手続きに要する計算時間の分布が、ベキ的に減衰することが分かった。さらに Chaitin number Ω のランダム性より、この計算時間の分布は、ベキよりも緩やかに減衰すると考えられる。同様にマンデルブロー集合に関して、判定手続きに要する計算時間の分布が、ベキ的またはそれより緩やかに減衰することが分かった。

万能言語を2次元平面上に埋め込んだ図形は、面積を持つファットフラクタルとなる。次元解析の結果、この図形の境界の box-counting 次元 (exterior dimension) は、計算時間の増加とともに空間の次元である2に漸近して行く。境界次元が空間次元と等しいことは、境界の ϵ 近傍の体積 (面積) が、 ϵ に依存しないことを示している。それはつまり、観測精度の誤差の存在下で、この集合に含まれるか否かを判定する場合には、観測精度をいくら上げても原理的に誤る確率を下げるができないことを意味する。決定不能性は本来、観測精度に関係なく存在するもので、この結果は合理的である。以上のように決定不能性を意味付けることができる。一方、マンデルブロー集合に関しては、境界のハウスドルフ次元が2となることが証明されているが、万能言語の場合と同様、境界の box-counting 次元を数値的に求めた結果、計算時間の増加とともに空間の次元である2に漸近して行くという、万能言語の場合と同じ振る舞いが見られた。

希土類及びアクチニド化合物の電子構造とフェルミ面

新潟大学大学院自然科学研究科 眞榮平孝裕

希土類化合物やアクチニド化合物の中には「強相関伝導系」と呼ばれる物質群があり、重い電子系、価数揺動系、複雑な磁気秩序、異方的超伝導など、とても特異で多彩な物性を示します。そのため研究者の興味も高く、世界的にもさかんに研究されています。そのような異常物性の起源が、4f 電子や 5f 電子を中心とした強い電子間相互作用によることは明らかですが、その解明にはバンド理論が基礎的役割を果たすことが期待されます。しかし、結晶内電子の多体効果を忠実に定式化することは容易なことではありません。そこで多体効果に対しては簡単化した近似として、局所密度近似を基礎とする相対論的バンド理論を用いて、希土類及びアクチニド化合物の電子構造を定量的に計算しています。

さて、これらの化合物の電子状態 (フェルミ面) を調べるための強力な実験手段として de Haas-van Alphen (dHvA) 効果の測定があります。フェルミ面の存在は金属の最も重要な特徴であり、結晶構造と電子密度の違いに従って、それぞれ独特なフェルミ面を持っています。金属の特性である電気や熱などの高い伝導度、金属の光沢 (光の反射) などに見られる金属の輸送的性質や光学的性質は、フェルミ面の形状や大きさに支配されています。従って、フェルミ面を決定することは金属の電子物性を理解する上で極めて重要なことになります。

希土類化合物やアクチニド化合物に対するこれまでの研究により、dHvA 効果の実験結果はサイクロトロン有効質量の大きさを別にすると、バンド理論の枠内で合理的にうまく説明されることが明らかにされています。この結果は、電子間相互作用に強く依存する有効質量

を別にすれば、フェルミ面の形状に関して、バンド理論が十分有効であるということを意味しています。

そこで今回の発表では、希土類化合物やアクチニド化合物に属するいくつかの化合物の電子構造と、導かれたフェルミ面における極値断面面積の詳細な解析結果を発表します。また、その結果から dHvA 効果による実験結果の説明を行います。

(1) CeSn₃ と UGe₃ の電子構造とフェルミ面。

これらの物質は価数揺動系に属し、磁気秩序はなく、低温における電子比熱係数は 53mJ/K²mol、20.4mJ/K²mol であり、アルカリ金属の約 10~20 倍もあります。それぞれについて dHvA 効果の起源の説明を行います。CeSn₃ については、主要な dHvA 効果周波数ブランチ γ の起源について詳細な説明を行います。

(2) Ce 化合物 (CeCo₂, CeRh₂, CeRu₂)、UPt₃ のフェルミ面。

これらの物質のフェルミ面を紹介します。また、Au、Ag、Cu など単純金属のフェルミ面についても紹介する予定です。

エネルギーバンド構造の計算は、相対論的線形化 Augmented Plane Wave (APW) 法 [1,2]、遍歴電子モデル、局所密度近似 (LDA) に基づく交換・相関ポテンシャル、マフィンティン近似に基づいて行われました。また、ポリゴンを用いた画像処理法に基づいて新しい視覚化技術を開発し、フェルミ面を立体的にわかり易く描きました [3]。

これらの研究は、樋口雅彦助手 (東北大理)、長谷川彰教授 (新潟大理) との共同で行われました。

[1] T. Takeda: J. Phys. F: Metal Phys. 9 (1979) 661.

[2] M. Higuchi and A. Hasegawa: J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 830.

[3] T. Machira, M. Higuchi and A. Hasegawa: to be published in J. Magn. & Magn. Mater. 140-144 (1998).